

Guía docente de la asignatura

**Termodinámica Química Aplicada
(2201124)**

Fecha de aprobación: 25/06/2024

Grado	Grado en Ingeniería Química	Rama	Ingeniería y Arquitectura				
Módulo	Tecnología Específica: Química Industrial	Materia	Termodinámica Química Aplicada				
Curso	2º	Semestre	1º	Créditos	6	Tipo	Obligatoria

PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES

Es recomendable haber cursado las asignaturas Matemáticas I y II, Física I, Química Física, así como:

- Capacidad para leer y comprender textos en inglés científico.
- Conocer los principios de la Termodinámica y propiedades físico-químicas.
- Competencias en cálculo diferencial e integral, álgebra de matrices y cálculo numérico.

BREVE DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS (Según memoria de verificación del Grado)

Cálculo y estimación de propiedades termodinámicas de sustancias puras. Propiedades residuales. Propiedades Molares Parciales. Disolución ideal. Propiedades de exceso. Cálculo de coeficientes de fugacidad. Cálculo de coeficientes de actividad. Cambios de entalpía en operaciones y procesos. Cálculo de composiciones de equilibrio entre fases en los diferentes sistemas que pueden presentarse en la industria química. Cálculo de composiciones de equilibrio químico.

COMPETENCIAS ASOCIADAS A MATERIA/ASIGNATURA**COMPETENCIAS GENERALES**

- CG01 - Poseer y comprender los conocimientos fundamentales en materias básicas y tecnológicas, que les capacite para el aprendizaje de nuevos métodos y teorías, y les dote de versatilidad para adaptarse a nuevas situaciones.
- CG02 - Saber aplicar los conocimientos de Ingeniería Química al mundo profesional, incluyendo la capacidad de resolución de cuestiones y problemas con iniciativa, toma de decisiones, creatividad y razonamiento crítico.
- CG03 - Adquirir la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes dentro del área de la Ingeniería Química, así como de extraer conclusiones y reflexionar críticamente sobre las mismas.



- CG04 - Saber transmitir de forma oral y escrita información, ideas, problemas y soluciones relacionados con la Ingeniería Química, a un público tanto especializado como no especializado.
- CG05 - Haber desarrollado las habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores de especialización con un alto grado de autonomía.
- CG08 - Trabajo en equipo

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

- CE07 - Conocimientos de termodinámica aplicada y transmisión de calor. Principios básicos y su aplicación a la resolución de problemas de ingeniería.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE (Objetivos)

- Calcular o estimar las propiedades termodinámicas de sustancias puras y disoluciones.
- Calcular o estimar los cambios de entalpía en operaciones y procesos.
- Calcular o estimar las composiciones de equilibrio entre fases y de equilibrio químico.
- Establecer la viabilidad termodinámica de un proceso.
- Comparar y seleccionar alternativas técnicas desde el punto de vista termodinámico.
- Realizar, de forma individual o en equipo, estudios bibliográficos relacionados con la termodinámica química, sintetizar y presentar los resultados de forma oral o escrita.
- Adquirir la formación y manejar las herramientas necesarias para aprender por sí mismo los métodos utilizados en el tratamiento termodinámico de los sistemas no considerados.

PROGRAMA DE CONTENIDOS TEÓRICOS Y PRÁCTICOS

TEÓRICO

1. Estudio termodinámico de sustancias puras.
 - Cambio de las propiedades termodinámicas con la presión y la temperatura. Aplicación al gas ideal. Cálculo de las propiedades termodinámicas de sustancias puras como gas ideal. Estimación de propiedades termodinámicas.
2. Diagrama de fases de sustancias puras.
 - Criterio de Equilibrio. Regla de las fases. Líneas de equilibrio de dos fases. Líneas de sublimación y vaporización. Descripción de los cambios de estado líquido-vapor. Ecuaciones para el ajuste de presiones de vapor.
3. Ecuaciones de estado.
 - Gas ideal. Factor de compresibilidad. Ecuaciones viriales de estado. Ecuaciones de estado cúbicas. Expresión única de las ecuaciones de estado cúbicas. Aplicación de las ecuaciones de estado.
4. Propiedades residuales.
 - Cálculo de las propiedades residuales. Cálculo de las propiedades termodinámicas de sustancias puras como fluidos reales.
5. Propiedades termodinámicas de sistemas fluidos homogéneos multicomponentes.
 - Potencial químico. Propiedades molares parciales. Cálculo de las propiedades molares parciales. Fugacidad. Cálculo de los coeficientes de fugacidad.
6. Propiedades de exceso.
 - Mezcla de gases ideales. Disolución ideal. Propiedades de exceso. Energía de Gibbs molar parcial de exceso. Coeficientes de actividad. Actividad.



7. Equilibrio Vapor-Líquido (EVL).

- EVL en mezclas binarias y multicomponente. Sistemas ideales: leyes de Raoult y de Dalton. Modelos de dos y tres parámetros para los coeficientes de actividad: Margules, van Laar, Wilson, NRTL, UNIQUAC. Aplicación a mezclas multicomponentes: método UNIFAC. Equilibrio líquido-líquido.

8. Estudio estequiométrico de las reacciones químicas.

- Tratamiento general de la estequiometría química. Conversión del reactivo limitante y extensión de la reacción.

9. Estudio termodinámico de las reacciones químicas.

- Cálculo de entalpías de reacción. Equilibrio químico en sistemas gaseosos. Cálculo de composiciones de equilibrio.

PRÁCTICO**Seminarios/Talleres, Aula de Informática:**

- Cálculo de propiedades como gas ideal y presiones de vapor de sustancias puras.
- Diagrama de fases.
- Aplicación de las ecuaciones de estado.
- Cálculo de las propiedades termodinámicas de fluidos puros.
- Equilibrio Líquido-Vapor.
- Cálculo de composiciones de equilibrio químico en sistemas gaseosos.

Trabajos prácticos:

- Estudio bibliográfico sobre las propiedades termodinámicas de una sustancia pura (individual, presentación por escrito).
- Análisis de un trabajo de investigación (en inglés) sobre propiedades de mezclas (en grupo, presentación oral).

BIBLIOGRAFÍA**BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL**

- Smith, J.M., van Ness, H.C. y Abbott, M.M.: Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química, 8ª Ed. McGraw-Hill (2018). BIBLIOTECA POLITÉCNICO. IQ/536 SMI int(7ª ed). [Libro electrónico](#) (8ª ed.)
- Prausnitz, J.M., Lichtenthaler, R.N. y Gomes de Azevedo, E.: Termodinámica Molecular de los Equilibrios de Fases, 3ª ed., Prentice Hall (2000) BIBLIOTECA POLITÉCNICO. IQ/536 PRA ter.
- Elliott, J.R., Lira, C.T. Introductory Chemical Engineering Thermodynamics, Second Edition. Prentice Hall (2012), BIBLIOTECA CIENCIAS FCI/536 ELL int. [Libro electrónico](#)
- Green, D.W.: Perry's chemical engineer's handbook, 9ª Ed. McGraw-Hill (2019), BIBLIOTECA POLITÉCNICA BPOL/66 PER 2019. [Libro electrónico](#) (8ª Ed.)

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

- Jaubert, J.N., Privat, R. Thermodynamic Models for Chemical Processes, ISTE Press - Elsevier (2021). [Libro electrónico](#)
- Gmehling, J., Kolbe, B., Kleiber, M. y Rarey, J. Chemical thermodynamics for process simulation, Wiley-VCH (2019). [Libro electrónico](#)
- Yeo, Y. K. Chemical Engineering Computation with MATLAB®. CRC Press (2017). [Libro electrónico](#)



- Heys, J.J. Chemical and Biomedical Engineering Calculations Using Python. Wiley (2017).
- Severance, C.R. Python para todos. Explorando la información con Python 3. Elliott Hauser, Sue Blumenberg (2020). [Libro electrónico](#)
- Kontogeorgis, G.M. y Folas, G.K. Thermodynamic Models for Industrial Applications, John Wiley (2010) BPOL/66.02 KON the.
- Lide, D.R. (Editor). CRC Handbook of Chemistry and Physics, CRC Press, 83ª ed. (2002). BIBLIOTECA FACULTAD DE CIENCIAS FCI/54 CRC crc.
- Poling, B.E., Prausnitz, J. M., O'Connell, J. P. The Properties of Gases and Liquids, McGraw-Hill (2001), 5ª ed. BIBLIOTECA POLITÉCNICO. IQ/66 POL pro.
- David R. Lide and Henry V. Kehiaian: CRC Handbook of Thermophysical and Thermochemical Data, CRC Press (1994). BIBLIOTECA POLITÉCNICO. IQ/536 LID crc
- Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, DOI: 10.1002/14356007, [Libro electrónico](#)

ENLACES RECOMENDADOS

- [PRADO](#)
- [Biblioteca de la Universidad de Granada](#)

Bases de datos:

- [NIST](#). Base de datos físico-químicos de sustancias puras.
- [KDB](#). Base de datos físico-químicos de sustancias puras.
- [Chemo](#). Base de datos físico-químicos de sustancias puras.
- [Dortmund Data Bank](#). Base de datos de propiedades termodinámicas de sustancias puras y mezclas.
- [PubChem](#). Base de datos físico-químicos de sustancias puras.

METODOLOGÍA DOCENTE

- MD01 - Lección magistral/expositiva
- MD02 - Resolución de problemas y estudio de casos prácticos o visitas a industrias
- MD04 - Prácticas en ordenadores

EVALUACIÓN (instrumentos de evaluación, criterios de evaluación y porcentaje sobre la calificación final)

EVALUACIÓN ORDINARIA

- Evaluación continua (10%): cuestiones teóricas y ejercicios prácticos relacionados con el cálculo de propiedades termodinámicas.
- Examen de curso (50%): cuestiones teóricas y ejercicios prácticos relacionados con el cálculo de propiedades termodinámicas, coeficientes de fugacidad, propiedades de exceso, coeficientes de actividad en mezclas líquidas, composiciones de equilibrio entre fases, composiciones de equilibrio químico.
- Trabajo de estimación y cálculo de propiedades termodinámicas, aplicando bases de datos actualizadas (10%).
- Trabajo en grupo de discusión de un artículo de investigación reciente sobre propiedades de mezclas, con presentación oral (10%).
- Evaluación de prácticas y seminarios (20%).



Es obligatoria la asistencia al menos al 80% de las clases prácticas y a la presentación oral de trabajos para obtener la calificación de estas actividades.
Para superar la asignatura será necesario obtener al menos una calificación de 4 sobre 10 en cada prueba y los trabajos.

EVALUACIÓN EXTRAORDINARIA

- Examen escrito con cuestiones teóricas y ejercicios prácticos (80%) relacionados con el cálculo de propiedades termodinámicas, coeficientes de fugacidad, propiedades de exceso, coeficientes de actividad en mezclas líquidas, composiciones de equilibrio entre fases, composiciones de equilibrio químico.
- Evaluación de prácticas y seminarios (20%). Los estudiantes con una calificación superior a 5 sobre 10 en los trabajos y evaluación de prácticas y seminarios en la convocatoria ordinaria podrán solicitar el reconocimiento para este 20% con una antelación de al menos una semana a la celebración del examen.

EVALUACIÓN ÚNICA FINAL

- Prueba teórica con cuestiones sobre propiedades termodinámicas de sustancias puras, ecuaciones de estado, coeficientes de fugacidad, coeficientes de actividad, composiciones de equilibrio entre fases y composiciones de equilibrio químico. (20%)
- Prueba práctica en la que se valorarán las competencias desarrolladas en la asignatura mediante la resolución de problemas. (40%)
- Prueba práctica de cálculo mediante ordenador de estimación y correlación de propiedades termodinámicas y composición de equilibrio entre fases (20%).
- Prueba oral en la que se expondrá y discutirá un artículo de investigación sobre el cálculo de propiedades termodinámicas (20%).

Para superar la asignatura será necesario obtener al menos una calificación de 4 sobre 10 en todas las pruebas.

INFORMACIÓN ADICIONAL

Información de interés para estudiantado con discapacidad y/o Necesidades Específicas de Apoyo Educativo (NEAE): [Gestión de servicios y apoyos \(https://ve.ugr.es/servicios/atencion-social/estudiantes-con-discapacidad\)](https://ve.ugr.es/servicios/atencion-social/estudiantes-con-discapacidad).

SOFTWARE LIBRE

Python: <https://www.python.org/>
Jupyter Notebook y JupyterLab: <https://jupyter.org/>
Spyder: <https://www.spyder-ide.org/>

